

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Bc. Jakub Jambrich
Název práce: Consistent non-equilibrium thermodynamic modeling of hydrogen fuel cells
Studijní program a obor: Matematické a počítačové modelování ve fyzice
Rok odevzdání: 2022

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Ondřej Souček, Ph.D.
Pracoviště: Matematický ústav Karlovy Univerzity, MFF UK
Kontaktní e-mail: ondrej.soucek@mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

Předložená diplomová práce se zabývá modelováním elektrochemických transportních procesů uvnitř vodíkových palivových článků v přiblížení stacionárního jedno-dimenzionálního problému.

V úvodní kapitole autor představuje základní předpoklady termodynamického modelu, který vychází z klasické nerovnovážné termodynamiky. V uvedené aproximaci se problém redukuje na hledání termodynamicky konzistentních vztahů mezi dvojicí termodynamických sil - gradientů elektrochemických potenciálů protonů a molekul vody a dvojicí toků těchto částic. Obecné koeficienty úměry mezi toky a silami jsou přeformulovány pomocí měřitelných veličin. Následně je aplikován relativně nový přístup redukující výrazně obecnou funkční závislost koeficientů matice na modelových proměnných, tzv. "functional constraint". S jeho využitím je odvozen finální model pro toky, který lze přepsat do tvaru dvou obyčejných diferenciálních rovnic. Ty jsou doplněny netriviální okrajové podmínky v podobě Butler-Volmerových rovnic pro tok protonů a podmínky Newtonova typu pro tok molekul vody. Systém je za určitých zjednodušujících předpokladů vyřešen analyticky. Ve druhé kapitole je popsáno fungování palivového článku v režimu vodíkové pumpy, jsou představeny externí experimentální data, na nichž byl model naladěn a z nichž jsou identifikovány dosud neurčené parametry modelu. Ten je následně studován numericky metodou konečných objemů implementovaných v knihovně Voronoi FVM. Výsledková část zahrnuje porovnání modelové odezvy a experimentálních dat pro tok protonů a vody v palivovém článku v závislosti na přiloženém napětí. Model umožňuje velmi dobrý fit pro tok protonů, ale pro druhý tok - tok vody - je fit nedostatečný. Tento nedostatek modelu je následně podroben diskusi a jsou provedeny i numerické experimenty pro ověření hypotézy o původu tohoto nesouladu s experimentem.

Práce je povedenou ukázkou matematického modelování v nejlepším smyslu tohoto slovního spojení. Zahrnuje totiž jak tvorbu matematického modelu z fundamentálních principů, redukci modelu v kontextu dané aplikace, získání vhledu do vlastností modelu pomocí analytických metod, numerickou implementaci a řešení a porovnání s experimentálními daty včetně jejich částečného zpracování a následné diskuse. Z tohoto pohledu je práce nadmíru vydařená. Mám v podstatě pouze dvě výtky, obě se týkají kapitoly 1, kde je prezentována teoretická formulace modelu. Tato část práce obsahuje poměrně velké množství typografických chyb, výrazně více než ostatní kapitoly, což působí rušivě. Také bych uvítal lepší a obsáhlejší představení základního konceptu "functional constraints" a diskusi některých jeho základních předpokladů, viz. dále. Celkově ale mohu konstatovat, že je práce z mého pohledu velice zdařilá a rozhodně ji **doporučuji uznat jako diplomovou a doporučuji ji k obhajobě.**

Některé nedostatky:

- str. 5 - v rovnicích 1.5 a 1.6 jsou prohozeny pravé strany
- str. 9 - zanedbání členu $\rho_c \frac{d\varphi_e}{dt}$ je argumentováno stacionaritou úlohy. To však není správná argumentace pokud by rychlostní pole bylo nenulové (byť stacionární) a gradient φ_e také (a nebyly to na sebe kolmé vektory).
- Str. 10 - rovnice pro bilanci vnitřní plus (elektro-)potenciální energie 1.35 je postulována bez zdrojových členů bez další argumentace. To obecně jistě není pravda, co například mechanická disipace?
- Str. 10 - chybná znaménka na pravé straně v rovnicích 1.40 a 1.41.
- Některé základní veličiny nejsou pořádně definovány, např. koncentrace c_w - až na straně 13 se z (chybně zapsané) jednotky dozvídáme, že se jedná o molární koncentraci. Chybí mi také reference na definice veličin typu difuzivity zavedené v 1.61.

- Str 32 - postrádám okrajové podmínky pro j_p .

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Systém je uvažován jako izotermální. Jak dobře je to splněno v praxi? Nevzniká při provozu článku někde například Jouleovo teplo?
- Při odvozování functional constraints se požaduje, aby koeficienty nezávisely na jedné z proměnných. V dané aplikaci je to splněno díky tomu, že danou proměnnou je elektrický potenciál. Co však, kdyby byla danou proměnnou např. teplota nebo jiná polní veličina. Dal by se daný předpoklad jakkoli obhájit? A jak by se procedura functional constraints změnila v případě couplingu mezi např. třemi toky a afinitami? A konečně, do jaké míry je v úvahách o functional constraints podstatné, že se uvažuje pouze 1D situace? Je šance zobecnit získané závěry do vyšších dimenzí?
- Functional constraints zdá se vynucují v daném modelu společné chování obou toků - je zde společná závislost na aktivitě molekul vody. Toto je ale, jak autor podotýká, v rozporu s pozorováními. Autor hledá vysvětlení ve větší komplexitě procesů na hranici membrány. Není však možné, že ansatz získaný pomocí functional constraints zkrátka neplatí? Byl tento koncept experimentálně robustně ověřen v jiných aplikacích?

Práci:

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl

Místo, datum a podpis oponenta:

Praha, 9. června 2022